

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**58. Savetovanje
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI
RADOVA**

KNJIGA RADOVA

**58th Meeting of
the Serbian Chemical Society**

**Book of Abstracts
Proceedings**

**Beograd 9. i 10. jun 2022. godine
Belgrade, Serbia, June 9-10, 2022**

Нитро-ацетилацетонато комплекси као нова класа високоенергетских материјала: синтеза, карактеризација и квантнохемијска проучавања

Данијела С. Кретић¹, Ивана С. Вељковић², Александра Б. Ђуновић³, Душан Ж. Вељковић¹

¹ Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија

² Универзитет у Београду - Институт за хемију, технологију и металургију, Центар за хемију, Његошева 12, Београд, Србија

³ Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд

Хелатна координациона једињења представљају нову класу високоенергетских материјала са унапређеним перформансама и стабилношћу. У овом раду користили смо квантнохемијске прорачуне да предвидимо детонационе карактеристике одабраних нитро-ацетилацетонатних комплекса прелазних метала. Мапе електростатичког потенцијала и енергије дисоцијације C-NO₂ веза су израчунате за ове комплексе и анализирани. Одабрани нитро-ацетилацетонато комплекси су синтетисани и окарактерисани помоћу УВ/ВИС спектроскопије. Резултати тестова у отвореном пламену су показали да нитро-ацетилацетонато комплекси горе приликом паљења и да ови молекули могу да се употребе као нова група високоенергетских материјала.

Nitro-acetylacetonato complexes as a new class of highly energetic materials: synthesis, characterization and quantum chemical studies

Danijela S. Kretić¹, Ivana S. Veljković², Aleksandra B. Đunović³, Dušan Ž. Veljković¹

¹ University of Belgrade-Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia

² University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia

³ Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia

Chelate coordination compounds represent a new class of promising highly energetic materials with improved performance and stability. In this work, we used quantum chemical calculations to predict detonation characteristics of selected nitro-acetylacetonato complexes of transition metals. Electrostatic potential maps and bond dissociation energies of C-NO₂ bonds were calculated for these complexes and analyzed. Selected nitro-acetylacetonato complexes were prepared and characterized by UV/VIS spectroscopy. The results of the open-flame tests showed that nitro-acetylacetonato complexes burn upon ignition and that these molecules could be used as a new class of highly energetic materials.

Acknowledgment: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM.